

空间采样傅里叶变换光谱仪光谱反演研究

吕金光^{1,2}, 梁静秋^{1*}, 梁中翥¹

1. 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所应用光学国家重点实验室, 吉林 长春 130033

2. 中国科学院研究生院, 北京 100049

摘要 根据相似性准则, 对采集到的干涉图像进行干涉图元的拆分, 通过寻址定位, 得到与离散光程差序列相匹配的采样干涉图序列。采用过零采样方式, 对大单边干涉图序列与小双边干涉图序列利用不同的窗函数进行切趾。为了校正相位误差, 结合所研究采样干涉图的特点, 对频域光谱乘积校正和空域干涉图卷积校正进行了研究和改进, 获得了比较理想的光谱线形, 其中空域干涉图卷积校正后的光谱偏差仅为 0.012 088, 具有最好的校正效果。

关键词 傅里叶变换光谱仪; 空间采样; 干涉图元; 光谱反演

中图分类号: O433.1 文献标识码: A DOI: 10.3964/j.issn.1000-0593(2012)06-1694-06

引言

傅里叶变换光谱仪是利用干涉图函数与光谱函数之间的傅里叶变换关系, 通过测量不同光程差位置的干涉光强, 来间接获得物质的光谱信息^[1]。为了方便、快捷、有效地得到物质的光谱信息, 对应于不同的应用领域, 国内外的科学家们提出了许多由干涉图序列反演光谱信息的方法。由于干涉图函数是一个关于零光程差对称的偶函数, 为了增加干涉图的采样长度以提高系统的光谱分辨率, 同时为了降低干涉图采样点漂移引起的相位误差, 科学家们提出了许多种干涉图采样与处理的方法。其中最常用的是 Mertz 和 Forman 方法, 他们都是在零光程差一侧采集一小段高信噪比的数据用于相位校正, 而在零光程差另一侧采集满足分辨率要求的数据用于光谱反演。后人又针对各自具体的研究内容对这两种方法进行了不同程度的改进^[2,3]。本工作也是利用这种过零采样方式, 根据所研究光谱仪干涉图像的生成与采集的特点, 结合干涉图像拆分技术, 对其进行改进与发展, 使算法与空间采样系统相匹配。

1 工作原理

所用傅里叶变换光谱仪^[4,5]的干涉系统采用传统的 Michelson 干涉结构, 不同的是两个平面反射镜由两个级数

均为 M 的阶梯形状的多级微反射镜代替, 如图 1 所示。阶梯间隔 d 遵循 Nyquist-Shannon 采样定理, 采样间隔 $\Delta = 2d$; 并且两个多级微反射镜遵循光程差互补原则。将两个多级微反射镜正交放置, 则在干涉光场的横向空间就会形成一个 $M \times M$ 的光程差的离散空间阵列, 从而在探测器上产生对应各个特定光程差的干涉图的采样点, 干涉图的采样点数为 $N = M^2$ 。

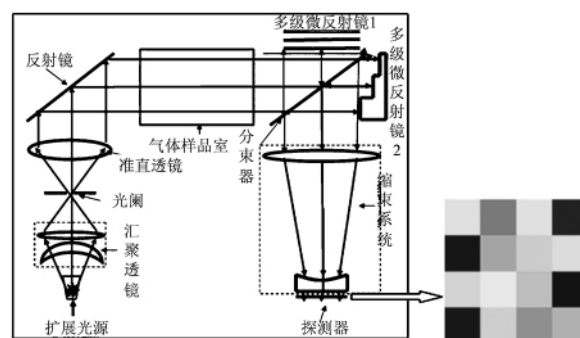


Fig 1 Principle diagram of spatially modulated Fourier transform spectrometer

由多级微反射镜的结构决定的离散光程差序列为

$$\delta[n(i, j)] = 2nd = 2(Mj - i)d \quad (1)$$

式中 (i, j) 为光程差阵列或干涉图阵列的序号。

经采样得到的干涉图序列为

收稿日期: 2011-11-10, 修订日期: 2012-02-15

基金项目: 国家自然科学基金项目(61027010, 60977062)和国家(863 计划)项目(2009AA04Z315)资助

作者简介: 吕金光, 1984 年生, 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所博士研究生 e-mail: jinguanglv@163.com

* 通讯联系人 e-mail: liangjq@ciomp.ac.cn

$$\begin{aligned}
 I[n(i, j)] &= \int_{\nu_1}^{\nu_2} B(\nu) e^{j2\pi n 2d} d\nu \\
 &= \int_{\nu_1}^{\nu_2} B(\nu) e^{j2\pi n (Mj-i) 2d} d\nu \quad (2)
 \end{aligned}$$

对 $I(n)$ 进行离散傅里叶变换运算, 就可以反演出其频域的光谱信息

$$\begin{aligned}
 B(\nu) &= 2d \sum_n I(n) e^{-j2\pi n 2d} \\
 &= 2d \sum_i \sum_j I(i, j) e^{-j2\pi n (Mj-i) 2d} \quad (3)
 \end{aligned}$$

这种干涉结构采样的干涉图的长度由多级微反射镜的阶数决定, 为了提高仪器的光谱分辨率, 同时为了进行相位校正, 在对干涉图进行采样的过程中采用过零采样方式。在零光程差一侧采集满足系统光谱分辨率要求的 N_1 个单边采样点, 在另一侧采集高信噪比的 N_2 个采样点, 一般 $N_2 = 10\% N_1$, 采样长度为 $N = N_1 + N_2$ 。因此, 整个采样干涉图序列就由一个小双边干涉图序列和一个大单边干涉图序列组成。

2 干涉图像拆分

由于两个多级微反射镜阵列在系统装调过程中与探测器之间可能会出现横向的相对旋转, 导致图像发生倾斜(如图 2), 所以需要对图像进行校正。在对图像进行旋转校正时, 各像素点的坐标将会发生变化, 使得旋转之后不能正好落在整数坐标处, 这里利用三次内插算法对旋转后图像的灰度级进行插值。对正后的图像, 干涉图部分的边缘会有一些背景影调, 因此需要对图像剪裁从而将干涉图部分取出, 如图 3。图像剪裁时, 通过对干涉图像的灰度范围的设定来生成一个掩模图像, 用于搜索干涉图像的坐标, 从而确定干涉图像的

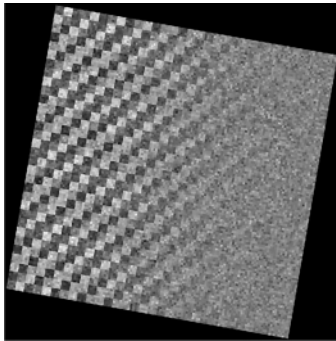


Fig 2 Digital tilted image with sampling error

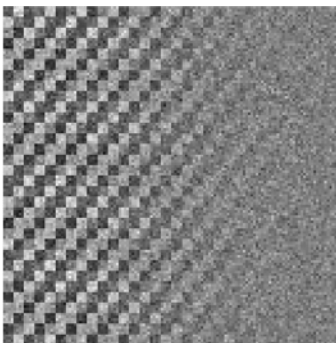


Fig 3 Recovered interferogram image after rotation correction

剪裁区域。

得到完整的干涉图像之后, 需要将图像 $I(i, j)$ 划分为 $M \times M$ 块具有不同灰度值的大小相等的干涉图元, 使其成为对应特定光程差位置的干涉图序列。以区域为对象对干涉图像进行拆分, 根据干涉图像的灰度相似性来划分干涉图的区域。利用图像数据的四叉树数据结构的层次概念, 先将干涉图像分为 2×2 块大小相等的区域, 然后根据给定的相似性准则检测每个区域是否满足标准, 如果不满足, 则将每个区域再拆分为 2×2 个区域, 并对每个区域继续应用检测标准, 分解过程重复迭代下去, 直到将图像分为数量为 $M \times M$ 个区域为止, 从而就得到一个长度为 M^2 的干涉图序列。

3 寻址切趾

对含有 $N_1 + N_2$ 个采样点的干涉图序列寻址, 对其中灰度值最大的数据点进行定位并返回其地址, 将其作为零光程差位置的干涉图采样点。然后对干涉图序列的每一个采样点匹配相应的光程差, 从而获得干涉图采样点的实际光程差坐标。对干涉图序列进行消直流、消趋势项、基线漂移校正和非均匀采样校正等一系列数据预处理, 得到交流的干涉图信号^[6-8], 如图 4 所示。

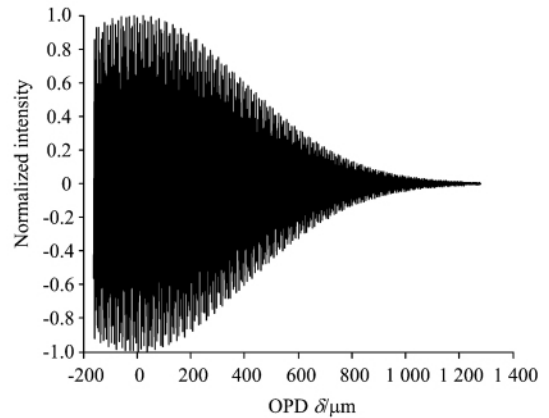


Fig 4 The interferogram sequence after image division

空域中干涉图采样的截止会导致频域中谱线的展宽并出现旁瓣振荡, 从而降低仪器的光谱分辨率, 同时带来一些虚假的光谱信息或掩盖一些弱光谱信号。需要用渐变的窗函数切趾来缓解干涉图信号采样终止时的阶跃突变, 从而抑制谱线两侧旁瓣的振荡。由于采用过零采样方式, 整个干涉图序列可以分为小双边干涉图序列和大单边干涉图序列。对小双边干涉图序列采用三角形窗函数切趾, 对大单边干涉图序列采用梯形窗函数切趾^[9,10], 如图 5 和图 6 所示。

4 相位校正

由于多级微反射镜制作精度的限制和系统装调误差的存在, 使得干涉图在采样的过程中, 采样点相对于理想位置会有一个相对位移, 从而导致采集到的干涉图数据中附加一定的相位误差。因此在对干涉图序列进行光谱反演时需要进行

相位校正^[11-14]。

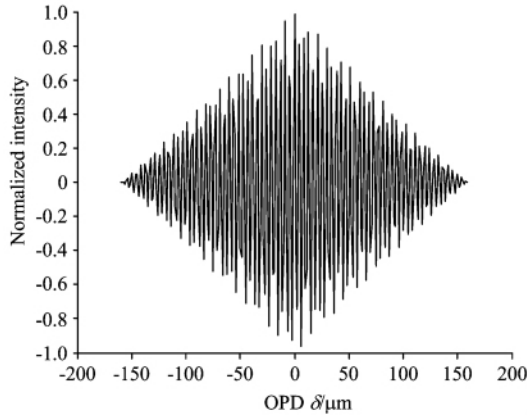


Fig 5 Small double-side interferogram after apodisation

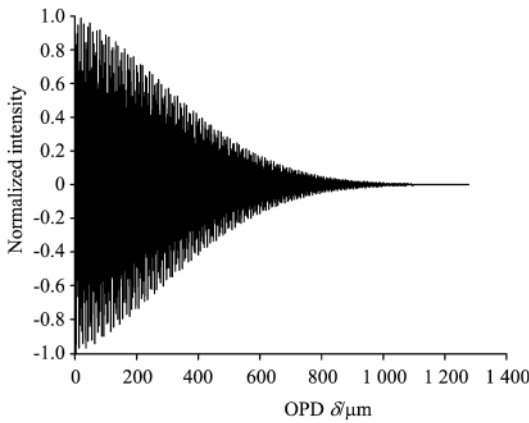


Fig 6 Big single-side interferogram after apodisation

4.1 频域光谱乘积校正

相位误差来自于系统非理想的相频响应,附加相位误差的干涉图可以表示为

$$I[\delta(n)] = \int_{\nu_1}^{\nu_2} B_0(\nu) e^{j[2\pi\delta(n)+\varphi(\nu)]} d\nu = F^{-1}\{B_0(\nu) e^{j\varphi(\nu)}\} \quad (4)$$

对附加相位误差的干涉图作傅里叶变换,可以看到理想的光谱受到一相位因子的调制,即

$$B_0(\nu) e^{j\varphi(\nu)} = F\{I[\delta(n)]\} \quad (5)$$

将附加相位误差的光谱解调,可以得出理想的光谱函数为

$$B_0(\nu) = e^{-j\varphi(\nu)} \times F\{I[\delta(n)]\} = e^{-j\varphi(\nu)} \times |B(\nu)| e^{j\theta(\nu)} = |B(\nu)| e^{j[\theta(\nu)-\varphi(\nu)]} \quad (6)$$

由于光谱函数是实函数,故可以表示为以下形式

$$B_0(\nu) = |B(\nu)| \cos[\theta(\nu) - \varphi(\nu)] \quad (7)$$

其中 $|B(\nu)|$ 是附加相位误差光谱的振幅, $\theta(\nu)$ 是附加相位误差光谱的相位。

设利用过零采样采集到的干涉图序列为 $I(n)$, $-N_2 \leq n \leq N_1 - 1$,其中小双边干涉图序列为 $I_d(n) = I(n)R\left(\frac{n}{2N_2}\right)$, $R\left(\frac{n}{2N_2}\right) = \begin{cases} 1, & -N_2 \leq n \leq N_2 - 1 \\ 0, & \text{else} \end{cases}$,大单边干涉图序列

为 $I_s(n) = I(n)R_{N_1}(n)$, $R_{N_1}(n) = \begin{cases} 1, & 0 \leq n \leq N_1 - 1 \\ 0, & \text{else} \end{cases}$ 。

系统利用 N_1 个大单边干涉图的数据点进行高分辨率的光谱反演。由于理想的干涉图函数是一个关于零光程差对称的偶函数,而离散傅里叶变换对有限长序列的运算隐含着周期性,所以为了使离散傅里叶变换算法匹配干涉图序列的偶对称性,需要将大单边干涉图序列进行折叠移位。为此将作离散傅里叶变换的大单边干涉图的序列变换为

$$I_{s1}(n) = \begin{cases} I_s(n), & 0 \leq n \leq N_1 - 1 \\ 0, & n = N_1 \\ I_s(2N_1 - n), & N_1 + 1 \leq n \leq 2N_1 - 1 \end{cases}$$

相位校正正是利用过零采样中零光程差两侧高信噪比的 $2N_2$ 个小双边数据点来获取相位误差。对 $2N_2$ 个小双边数据点作离散傅里叶变换,得到的是低光谱分辨率的相位误差。为了获得高光谱分辨率的相位误差,我们采用插值法、补零法和延拓法,并对这三种方法进行比较。

插值法是将低光谱分辨率的相位误差进行插值运算,得到高光谱分辨率的相位误差。利用插值法作变换的小双边干涉图序列的形式为

$$I_{d1}(n) = \begin{cases} I_d(n), & 0 \leq n \leq N_2 - 1 \\ I_d(n - 2N_2), & N_2 \leq n \leq 2N_2 - 1 \end{cases}$$

对 $I_{d1}(n)$ 进行离散傅里叶变换后得到光谱数据,其光谱分辨率为 $\frac{1}{2N_2\Delta}$ 。对光谱的相位函数作插值运算来拟合样条曲线,然后对拟合曲线作二次采样,便得到光谱分辨率为 $\frac{1}{2N_1\Delta}$ 的相位函数。

补零法是将 $2N_2$ 个小双边数据点进行补零,补零点个数为 $2(N_1 - N_2)$,故进行离散傅里叶变换的小双边干涉图的序列形式为

$$I_{d2}(n) = \begin{cases} I_d(n), & 0 \leq n \leq N_2 - 1 \\ 0, & N_2 \leq n \leq 2N_1 - N_2 - 1 \\ I_d(n - 2N_1), & 2N_1 - N_2 \leq n \leq 2N_1 - 1 \end{cases}$$

对小双边干涉图序列补零处理,虽然不能提高光谱的实际分辨率,但可以提高光谱的表现分辨率,使其与大单边干涉图序列的光谱分辨率相一致。

由于离散傅里叶变换对有限长序列的运算隐含着周期性,所以对小双边干涉图序列进行周期延拓,并不会改变其光谱的性质,同时会使其与大单边干涉图序列具有相同的光谱分辨率。将 $2N_2$ 个小双边采样点进行 $2N_2$ 位周期延拓,延拓周期个数为 $\left\lceil \frac{N_1}{N_2} \right\rceil + 1$,然后取 $2N_1$ 位主值序列,就可以得到的小双边干涉图的序列形式为

$$I_{d3}(n) = \sum_{m=0}^{\left\lceil \frac{N_1}{N_2} \right\rceil} I_d(n - m2N_2) \cdot R_{2N_1}(n)$$

对折叠移位后的大单边干涉图序列进行离散傅里叶变换运算,获得附加有相位误差的光谱的幅频响应与相频响应,再结合通过插值、补零或延拓方法得到的具有相同光谱分辨率的小双边干涉图的相位函数,由式(7)便可解调出实际的光谱曲线。

图7是利用插值法、补零法和延拓法对相位误差进行校正后反演的复原光谱图。由图可以看出,三种方法均可以获得比较理想的光谱线形。经计算表明,归一化的校正光谱与理想光谱的标准偏差分别为 $\sigma_b = 1.2730 \times 10^{-2}$, $\sigma_c = 1.272$

8×10^{-2} , $\sigma_d = 1.2572 \times 10^{-2}$ 。可见,延拓法得到的光谱偏差要小于插值法和补零法。

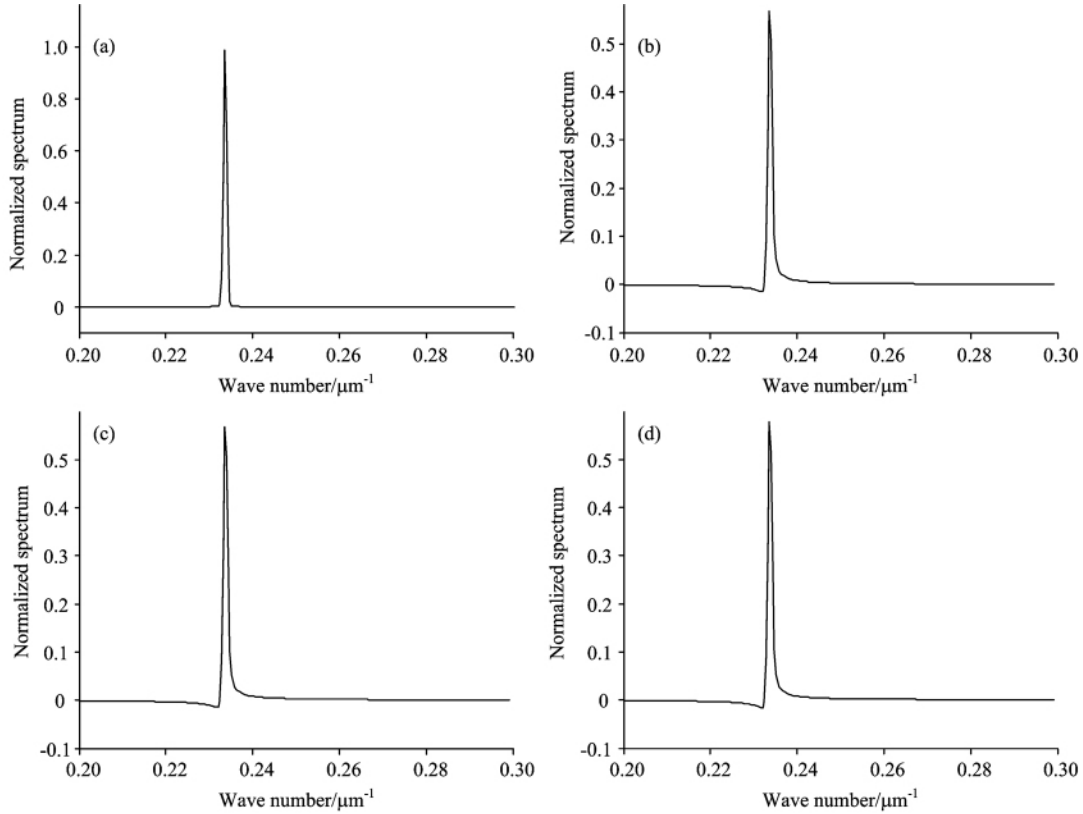


Fig. 7 The recovered spectrum after phase correction

(a): Ideal spectrum; (b): Interpolation; (c): Zero fill; (d): Continuation

4.2 空域干涉图卷积校正

由式(5)可以看出,光谱函数受到一个相位因子 $e^{j\varphi(\nu)}$ 的调制,所以理想光谱可以表示为

$$B_0(\nu) = F\{I[\delta(n)]\} \times e^{-j\varphi(\nu)} \quad (8)$$

对上式两边同时作傅里叶逆变换,即可解调出理想的干涉图函数

$$I_0(\delta) = I(\delta) * F^{-1}\{e^{-j\varphi(\nu)}\} = I(\delta) * D(\delta) \quad (9)$$

式中“*”表示卷积运算,定义 $D(\delta) = F^{-1}\{e^{-j\varphi(\nu)}\}$ 为干涉图解调函数。

对干涉图同样采取过零采样,利用高信噪比的小双边干涉图序列计算干涉图解调函数,用以从大单边干涉图序列中解调出理想的干涉图序列。通过对小双边干涉图序列 $I_d(n)$ 进行离散傅里叶变换,可以得出其光谱的相位函数,从而得到相位解调因子 $e^{-j\varphi(\nu)}$ 。对相位解调因子再作一次离散傅里叶逆变换,便可以得到干涉图解调函数序列 $D(n)$ 。

干涉图校正时,以循环卷积来计算式(9)的线性卷积。折叠移位后的大单边干涉图序列和干涉图解调函数序列的长度分别为 $2N_1$ 和 $2N_2$,线性卷积后的序列长度为 $2N_1 + 2N_2 - 1$ 。要利用循环卷积计算线性卷积,循环卷积的长度必须满足 $L \geq 2N_1 + 2N_2 - 1$ 。将大单边干涉图序列和干涉图解调函

数序列延长至 $2N_1 + 2N_2 - 1$,延长部分均填充为零值,得到大单边干涉图的序列形式为

$$I'_s(n) = \begin{cases} I_s(n), & 0 \leq n \leq N_1 - 1 \\ 0, & N_1 \leq n \leq N_1 + 2N_2 - 1 \\ I_s(2N_1 + 2N_2 - 1 - n), & N_1 + 2N_2 \leq n \leq 2N_1 + 2N_2 - 2 \end{cases}$$

干涉图解调函数的序列形式为

$$D'(n) = \begin{cases} D(n), & 0 \leq n \leq N_2 - 1 \\ 0, & N_2 \leq n \leq 2N_1 + N_2 - 2 \\ D(n - 2N_1 + 1), & 2N_1 + N_2 - 1 \leq n \leq 2N_1 + 2N_2 - 2 \end{cases}$$

将补零后的大单边干涉图序列与补零后的干涉图解调函数序列作循环卷积运算,便可得到理想的干涉图序列 $I_0(n)$,序列长度为 $2N_1 + 2N_2 - 1$,如图8所示。

对理想干涉图序列再作一次离散傅里叶变换,便可反演出理想的光谱信息,其光谱分辨率为 $\frac{1}{(2N_1 + 2N_2 - 1)\Delta}$,如图9所示。可以看出,利用此方法可以获得比较理想的光谱线形;经计算表明,归一化的校正光谱与理想光谱之间的标准偏差为 $\sigma_e = 1.2088 \times 10^{-2}$ 。

比较插值法、补零法、延拓法与空域干涉图校正方法,可以看出相位校正后的光谱线形相差不大。其中空域干涉图校正后的反演光谱标准偏差最小,其次是延拓法,再次是补零法,插值法得到的光谱误差相对较大。为了更精确的反演出理想的光谱线形,选择空域干涉图校正方法进行光谱反演比较合适。

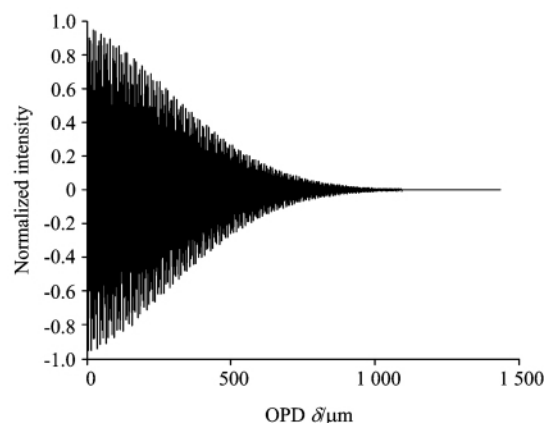


Fig 8 The interferogram after demodulation

5 结 论

对空间调制型静态傅里叶变换光谱仪干涉图像的数据处理技术进行了研究。对采集到的数字图像进行插值旋转以校正倾斜误差,提取图像中的干涉图部分,获得干涉图像;以区域为对象,以相似性准则为标准将干涉图像拆分为 $M \times M$

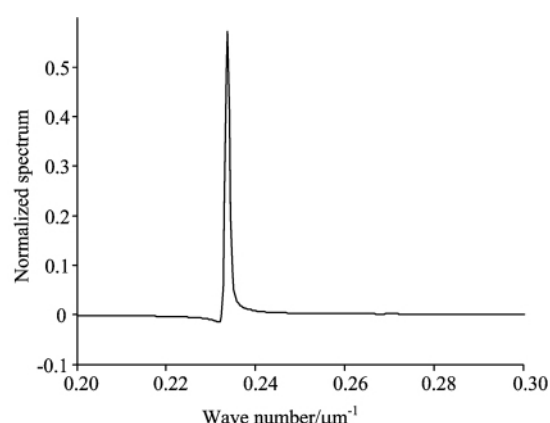


Fig 9 The spectrum inversed by demodulated interferogram

个干涉图元,获得采样干涉图序列。通过对其寻址定位,将实际的光程差序列与采样干涉图序列相匹配。为了降低频域谱线的展宽与边瓣的振荡,利用两个窗函数对过零采样获得的两个干涉图序列进行了切趾处理。为了校正系统相位误差,结合本系统采样干涉图特点,对频域光谱乘法与空域干涉图卷积法进行了研究与改进。两种方法均利用小双边干涉图序列计算系统的误差相位,用以校正利用大单边干涉图序列计算的光谱。对于光谱乘积校正,利用插值法、补零法与延拓法均可以实现低光谱分辨率的误差相位的高分辨率响应。对于干涉图解卷积校正,利用循环卷积来计算线性卷积,实现了干涉图序列的解调。两种方法均获得了比较理想的光谱线形,其中干涉图解卷积校正具有更小的光谱偏差。

References

- [1] WENG Shi-fu(翁诗甫). Fourier Transform Infrared Spectrometer(傅里叶变换红外光谱仪). Beijing: Chemical Industry Press(北京:化学工业出版社), 2005. 34.
- [2] XIANGLI Bin, YUAN Yan(相里斌,袁艳). Acta Photonica Sinica(光子学报), 2006, 35(12): 1869.
- [3] JIAN Xiao-hua, ZHANG Chun-min, ZHAO Bao-chang(简小华,张淳民,赵保常). Acta Physica Sinica(物理学报), 2007, 56(2): 824.
- [4] WANG Bo, LIANG Zhong-zhu, KONG Yan-mei, et al(王波,梁中翥,孔延梅,等). Acta Physica Sinica(物理学报), 2010, 59(2): 907.
- [5] LÜ Jin-guang, LIANG Zhong-zhu, FU Jian-guo, et al(吕金光,梁中翥,付建国,等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2011, 31(10): 2865.
- [6] YANG Xiao-xu, ZHOU Si-zhong, XIANGLI Bin(杨晓许,周泗忠,相里斌). Acta Photonica Sinica(光子学报), 2005, 34(11): 1647.
- [7] LI Bao-sheng, LIU Yong, YU Qing-hua, et al(李保生,刘勇,于清华,等). Optics and Precision Engineering(光学精密工程), 2007, 15(1): 16.
- [8] LI Bao-sheng, LIU Yong, WANG An(李保生,刘勇,王安). J. Infrared Millim. Waves(红外与毫米波学报), 2007, 26(3): 201.
- [9] ZHANG Wen-juan, ZHANG Bing, ZHANG Xia, et al(张文娟,张兵,张霞,等). J. Infrared Millim. Waves(红外与毫米波学报), 2008, 27(3): 227.
- [10] LÜ Qun-bo, XIANGLI Bin, HUANG Min, et al(吕群波,相里斌,黄旻,等). Acta Photonica Sinica(光子学报), 2009, 38(7): 1746.
- [11] SUN Ya-min, YIN De-kui(孙雅敏,殷德奎). Signal Processing(信号处理), 2008, 24(6): 1048.
- [12] LIU Yong, WU Jian-dong, ZHU Ling, et al(刘勇,巫建东,朱灵,等). Acta Optica Sinica(光学学报), 2009, 29(6): 1697.
- [13] LI Su-ning, ZHU Ri-hong, LI Jian-xin, et al(李苏宁,朱日宏,李建欣,等). Journal of Applied Optics(应用光学), 2009, 30(2): 268.
- [14] CHEN Ming-xing, ZHU Ling, ZHANG Long, et al(陈明星,朱灵,张龙,等). Chinese Journal of Scientific Instrument(仪器仪表学报), 2010, 31(3): 488.

Study on Spectrum Inversion of Spatially Modulated Fourier Transform Spectrometer

LÜ Jin-guang^{1, 2}, LIANG Jing-qiu^{1*}, LIANG Zhong-zhu¹

1. State Key Laboratory of Applied Optics, Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033, China
2. Graduate University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

Abstract The sampling mode of static Fourier transform spectrometer is spatial domain sampling. The interferogram function is sampled by two orthogonal stepped mirrors and the interference irradiance is received by the detector. The interferogram image is a planar spatial array which consists of $M \times M$ interferogram units. After image segmentation, the interferogram image is divided into $M \times M$ interferogram units according to comparability criterion. By means of addressing location, the sampled interferogram sequence which matches up to the discrete optical path difference sequence could be gained. Using over-zero sampling technique, the big single side interferogram sequence and the small double side interferogram sequence are apodized by different window functions. For the sake of correcting phase error, the frequency-domain spectrum correction and space-domain interferogram correction are researched and improved. The simulation result shows that the two methods can both gain the perfect spectrum line shape, and the effect of space-domain interferogram correction is better than others with the spectrum standard deviation only 0.012 088.

Keywords Fourier transform spectrometer; Spatial sampling; Interferogram unit; Spectrum inversion

(Received Nov. 10, 2011; accepted Feb. 15, 2012)

* Corresponding author